Metode directe pentru sisteme de ecuații liniare Eliminare gaussiană, descompunere LU, Cholesky

Radu T. Trîmbiţaş

Universitatea "Babeș-Bolyai"

6 aprilie 2020

Rezolvarea sistemelor liniare

• În notație matricială, un sistem se scrie sub forma

$$Ax = b$$

unde $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$. $b \in \mathbb{K}^{n \times 1}$.

- Solutia $x = A^{-1}b$
- În majoritatea problemelor practice inversarea este nenecesară şi nerecomandabilă
- Exemplu extrem, n=1: 7x=21, cu soluția $x=\frac{21}{7}=3$, o operație /
- Rezolvat prin inversare ne dă $x = 7^{-1} \cdot 21 = 0.1428571 \cdot 21 = 3.0000002$, două operații /,*
- Considerații similare se aplică și la sisteme cu mai multe ecuații și chiar la sisteme cu aceeași matrice A și membri drepți diferiți



Un exemplu numeric I

Considerăm exemplul

$$\begin{bmatrix} 10 & -7 & 0 \\ -3 & 2 & 6 \\ 5 & -1 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7 \\ 4 \\ 6 \end{bmatrix}$$

• $0.3E_1 + E_2 \rightarrow E_2$, $-0.5E_1 + E_3 \rightarrow E_3$. Coeficientul 10 al lui x_1 se numește *pivot*, iar cantitățile -0.3 și 0.5 obținute prin împărțirea coeficienților lui x_1 din celelalte ecuații se numesc *multiplicatori*

$$\begin{bmatrix} 10 & -7 & 0 \\ 0 & -0.1 & 6 \\ 0 & 2.5 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7 \\ 6.1 \\ 2.5 \end{bmatrix}$$

Un exemplu numeric II

• Pasul 2, eliminarea lui x_2 din a treia ecuație. Pivotul, coeficientul lui x_2 , -0.1 este mai mic decât alți coeficienți. Din acest motiv ecuațiile 2 și 3 trebuie interschimbate, operație numită *pivotare*. În acest caz nu este necesară, dar în general este crucială.

$$\begin{bmatrix} 10 & -7 & 0 \\ 0 & 2.5 & 5 \\ 0 & -0.1 & 6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7 \\ 2.5 \\ 6.1 \end{bmatrix}$$

• Pasul 3, $0.04E_2 + E_3 \rightarrow E_3$ (Cât ar fi multiplicatorul fără interschimbare?)

$$\begin{bmatrix} 10 & -7 & 0 \\ 0 & 2.5 & 5 \\ 0 & 0 & 6.2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7 \\ 2.5 \\ 6.2 \end{bmatrix}$$



Un exemplu numeric III

Ultima ecuație

$$6.2x_3 = 6.2$$

ne dă $x_3 = 1$.

• Înlocuind în a doua ecuație

$$2.5x_2 + 5 \cdot 1 = 2.5 \Longrightarrow x_2 = -1.$$

• Înlocuind în prima ecuație

$$10x_1 + (-7)(-1) = 7 \Longrightarrow x_1 = 0.$$

Soluţia este

$$x = \left[\begin{array}{c} 0 \\ -1 \\ 1 \end{array} \right]$$



Un exemplu numeric IV

Verificare

$$\begin{bmatrix} 10 & -7 & 0 \\ -3 & 2 & 6 \\ 5 & -1 & 5 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7 \\ 4 \\ 6 \end{bmatrix}.$$

Algoritmul poate fi exprimat mai compact în formă matricială, fie

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0.5 & 1 & 0 \\ -0.3 & -0.04 & 1 \end{bmatrix}, U = \begin{bmatrix} 10 & -7 & 0 \\ 0 & 2.5 & 5 \\ 0 & 0 & 6.2 \end{bmatrix}, P = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

 Matricea L este matricea multiplicatorilor, U este matricea finală, P descrie pivotarea și

$$LU = PA$$

 Matricea originală poate fi exprimată ca produs de matrice cu o structură mai simplă.

Factorizare LU

- Algoritmul folosit aproape universal pentru rezolvarea sistemelor liniare este eliminarea gaussiană.
- Cercetările din perioada 1955-1965 au evidențiat aspecte ale EG netratate până atunci: alegerea pivoților și interpretarea corectă a efectului erorilor de rotunjire
- EG are două stadii, triunghiularizarea matricei inițiale și substituția inversă

Matrice de permutare și triunghiulare I

 O matrice de permutare se obţine din matricea identică prin permutări de linii sau coloane. O astfel de matrice are exact un 1 pe fiecare linie şi coloană şi în rest 0.

$$P = \left[\begin{array}{cccc} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{array} \right]$$

- Efect: PA permutare de linii, AP permutare de coloane
- MATLAB utilizează și vectori de permutare ca indici de linie sau coloane; fie p = [4 1 3 2], P*A și A(p,:) sunt echivalente, la fel A*P și A(:,p). Notația vectorială este mai rapidă și utilizează mai puțină memorie.

Matrice de permutare și triunghiulare II

- Soluția sistemului Px = b, P matrice de permutare, este $x = P^T b$, adică o rearanjare a componentelor lui b.
- O matrice triunghiulară superior are toate elementele nenule deasupra diagonalei principale sau pe ea, adică $a_{ii} = 0$ dacă i > j.
- Analog se definesc şi matricele triunghiulare inferior. La rezolvarea sistemelor liniare sunt importante şi matricele triunghiulare inferior care au toate elementele de pe diagonala principală egale cu 1 unit lower triangular matrices.
- Sistemele liniare cu matricea triunghiulară sunt ușor de rezolvat în timp $\Theta(m^2)$.
- Măsura complexității -Numărul de operații în virgulă flotantă.

Algoritm pentru sistem triunghiular superior

```
function x = backsubst(U,b)
%BACKSUBST - backward substitution
%U - upper triangular matrix
%b - right hand side vector

n=length(b);
x=zeros(size(b));
for k=n:-1:1
    x(k)=(b(k)-U(k,k+1:n)*x(k+1:n))/U(k,k);
end
```

Algoritm pentru sistem triunghiular inferior

```
function x=forwardsubst(L,b)
%FORWARDSUBST - forward substitution
%L - lower triangular matrix
%b - right hand side vector

x=zeros(size(b));
n=length(b);
for k=1:n
    x(k)=(b(k)-L(k,1:k-1)*x(1:k-1))/L(k,k);
end
```

Descompunerea LU

- Transformă $A \in \mathbb{C}^{m \times m}$ într-o matrice triunghiulară superior, U scăzând multiplii de linii
- Fiecare L_i introduce zerouri sub diagonală în coloana i:

$$\underbrace{L_{m-1}\dots L_2L_1}_{L^{-1}}A=U\Longrightarrow A=LU \text{ unde } L=L_1^{-1}L_2^{-1}\dots L_{m-1}^{-1}$$

$$\begin{bmatrix} \times \times \times \times \times \\ \times \times \times \times \times \\ \times \times \times \times \times \\ \times \times \times \times \times \end{bmatrix} \xrightarrow{L_1} \begin{bmatrix} \times \times \times \times \\ \mathbf{0} \times \times \times \\ \mathbf{0} \times \times \times \\ \mathbf{0} \times \times \times \end{bmatrix} \xrightarrow{L_2} \begin{bmatrix} \times \times \times \times \\ \times \times \times \\ \mathbf{0} \times \times \\ \mathbf{0} \times \times \end{bmatrix} \xrightarrow{L_3} \begin{bmatrix} \times \times \times \times \\ \times \times \times \\ \times \times \times \\ \mathbf{0} \times \end{bmatrix}$$

$$A \qquad L_1 A \qquad L_2 L_1 A \qquad L_3 L_2 L_1 A$$

"Triunghiularizare triunghiulară"

◆□▶ ◆□▶ ◆□▶ ◆□▶ □ り♀○

Matricele L_k

• La pasul k se elimină elementele de sub A_{kk} :

$$x_k = \begin{bmatrix} x_{11} & \cdots & x_{kk} & x_{k+1,k} & \cdots & x_{mk} \end{bmatrix}^T$$

$$L_k x_k = \begin{bmatrix} x_{11} & \cdots & x_{kk} & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}^T$$

• Multiplicatorii $\ell_{jk} = x_{jk}/x_{kk}$ apar in L_k :



Construcția lui L

 Matricea L conține toți multiplicatorii într-o singură matrice (cu semne +)

$$L = L_1^{-1} L_2^{-1} \dots L_{m-1}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ \ell_{21} & 1 & & & \\ \ell_{31} & \ell_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\ \ell_{m1} & \ell_{m2} & \cdots & \ell_{m,m-1} & 1 \end{bmatrix}$$

- Definim $\ell_k = [0, \dots, 0, \ell_{k+1,k}, \dots, \ell_{m,k}]^T$. Atunci $L_k = I \ell_k e_k^*$.
 - Avem $L_k^{-1} = I + \ell_k e_k^*$, deoarece $e_k^* \ell_k = 0$ și $(I \ell_k e_k^*) (I + \ell_k e_k^*) = I \ell_k e_k^* \ell_k e_k^* = I$
 - De asemenea, $L_k^{-1}L_{k+1}^{-1} = I + \ell_k e_k^* + \ell_{k+1} e_{k+1}^*$, deoarece $e_k^*\ell_{k+1} = 0$ și $\left(I + \ell_k e_k^*\right) \left(I + \ell_{k+1} e_{k+1}^*\right) = I + \ell_k e_k^* + \ell_{k+1} e_{k+1}^* + \ell_k e_k^*\ell_{k+1} e_{k+1}^*$

Eliminare gaussiană fără pivotare

• Se factorizează $A \in \mathbb{C}^{m \times m}$ în A = LU

Eliminare gaussiană fără pivot

$$U := A; L = I;$$

for $k := 1$ to $m - 1$ do
for $j := k + 1$ to m do
 $\ell_{jk} := u_{jk} / u_{kk};$
 $u_{i,k:m} := u_{j,k:m} - \ell_{jk} u_{k,k:m};$

- Ciclul interior poate fi scris utilizând operații matriciale în loc de cicluri for
- Număr de operații (complexitatea) $\sim \sum_{k=1}^{m} 2(m-k)(m-k) \sim 2\sum_{k=1}^{m} k^2 \sim \frac{2}{3}m^3$



Eliminare gaussiană cu produs exterior

• Ciclul interior poate fi scris cu operații matriciale în loc de for

Eliminare gaussiană cu produs exterior

for
$$k := 1$$
 to $m-1$ do
 $rows := k+1 : m;$
 $A_{rows,k} := A_{rows,k}/A_{k,k};$
 $A_{rows,rows} := A_{rows,rows} - A_{rows,k}A_{k,rows};$

Matricea $S = A_{k+1:m,k+1:m} - A_{k+1:m,k} A_{k,k+1:m}$ se numește complement Schur al lui A în raport cu $a_{k,k}$.

Necesitatea pivotării I

- EG așa cum a fost prezentată este instabilă.
- Pentru anumite matrice EG poate eșua, datorită tentativei de împărțire la zero

$$A = \left[\begin{array}{cc} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{array} \right]$$

- Matricea este nesingulară și bine condiționată; $condA = \frac{3+\sqrt{5}}{2} \approx 2.168$
- Fenomenul este mai general; este evidențiat de o ușoară perturbație a lui A

$$A = \left[\begin{array}{cc} 10^{-20} & 1 \\ 1 & 1 \end{array} \right]$$



Necesitatea pivotării II

Acum procesul nu eșuează; se obține (în aritmetica exactă)

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 10^{20} & 1 \end{bmatrix}, \quad U = \begin{bmatrix} 10^{-20} & 1 \\ 0 & 1 - 10^{20} \end{bmatrix}$$

- În aritmetica în virgulă flotantă, dublă precizie, $1-10^{20}$ nu este reprezentabil exact, el se va rotunji la -10^{20}
- Factorii calculați ai descompunerii vor fi

$$\widetilde{L} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 10^{20} & 1 \end{bmatrix}, \quad \widetilde{U} = \begin{bmatrix} 10^{-20} & 1 \\ 0 & -10^{20} \end{bmatrix}$$

• Produsul $\widetilde{L}\widetilde{U}$ nu este apropiat de A

$$\widetilde{L}\widetilde{U} = \left[\begin{array}{cc} 1 & 0 \\ 10^{20} & 1 \end{array} \right] \cdot \left[\begin{array}{cc} 10^{-20} & 1 \\ 0 & -10^{20} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{cc} 10^{-20} & 1 \\ 1 & 0 \end{array} \right]$$



Necesitatea pivotării III

Rezolvând sistemul

$$\widetilde{L}\widetilde{U}x = \left[\begin{array}{c} 1\\ 0 \end{array}\right]$$

se obține
$$\widetilde{x}=\left[\begin{array}{c}0\\1\end{array}\right]$$
, dar soluția corectă este $x=\left[\begin{array}{c}-1\\1\end{array}\right]$

- Explicație: EG nu este nici regresiv stabilă, nici stabilă (ca algoritm de factorizare). Mai mult, matricele triunghiulare obținute pot fi foarte prost condiționate, introducându-se astfel o sursă suplimentară de instabilitate.
- **Observație:** Dacă un pas al unui algoritm nu este regresiv stabil, algoritmul întreg poate fi instabil.



Pivotare

 La pasul k, am utilizat elementul k, k al matricei ca pivot și am introdus zerouri în coloana k a liniilor rămase

• Dar, orice alt element $i \ge k$ din coloana k poate fi utilizat ca pivot:

Pivotare

• De asemenea, se poate utiliza orice altă coloană $j \ge k$:

- Alegând diferiți pivoți ne asigurăm că putem evita pivoții nuli sau foarte mici
- În loc să utilizăm pivoți în poziții diferite, putem interschimba linii sau coloane și să utilizăm algoritmul standard (pivotare)
- O implementare concretă poate face pivotarea indirect, fără a muta fizic datele



Pivotare parțială

- Alegerea pivoților dintre toți candidații valizi este costisitoare(pivotare completă)
- Considerăm doar pivoții din coloana k şi interschimbăm liniile(pivotare parțială)

Cu operații matriceale:

$$L_{m-1}P_{m-1}\dots L_2P_2L_1P_1A=U$$

Factorizarea PA = LU

• Pentru a combina toți L_k și toți P_k în forma dorită de noi, rescriem factorizarea precedentă sub forma

$$L_{m-1}P_{m-1}\dots L_2P_2L_1P_1A = U$$

$$(L'_m \cdots L'_2L'_1) (P_{m-1} \cdots P_2P_1) A = U$$

unde

$$L'_{k} = P_{m-1} \cdots P_{k+1} L_{k} P_{k+1}^{-1} \cdots P_{m-1}^{-1}$$

Aceasta ne dă factorizare (descompunerea) LU a lui A

$$PA = LU$$



Eliminarea gaussiană cu pivotare parțială

• Factorizează $A \in \mathbb{C}^{m \times m}$ în PA = LU

Eliminare gaussiană cu pivotare parțială

```
\begin{split} &U := A; \ L := I; \ P := I; \\ &\textbf{for} \ k := 1 \ \textbf{to} \quad m - 1 \ \textbf{do} \\ & \text{Alege} \ i \geq k \ \text{care maximizeaza} \ |u_{ik}|; \\ & u_{k,k:m} \leftrightarrow u_{i,k:m}; \ \{\text{interschimbare}\} \\ & \ell_{k,1:k-1} \leftrightarrow \ell_{i,1:k-1}; \\ & P_{k,:} \leftrightarrow P_{i,:}; \\ & \textbf{for} \ j := k+1 \ \textbf{to} \quad m \ \textbf{do} \\ & \ell_{jk} := u_{jk}/u_{kk}; \\ & u_{j,k:m} := u_{j,k:m} - \ell_{jk}u_{k,k:m}; \end{split}
```

Algoritmul devine mai eficient dacă se fac toate calculele în situ (în matricea A).

Cod MATLAB pentru descompunerea LUP

```
function [L,U,P]=lup(A)
                                        %Schur complement
%LUP - LUP decomposition of A
                                        lin=i+1:m;
                                        A(lin,i)=A(lin,i)/A(i,i);
%permute effectively lines
                                        A(lin,lin)=A(lin,lin)-...
[m.n] = size(A):
                                         A(lin.i)*A(i.lin):
P=zeros(m,n):
                                   end:
piv=(1:m);
                                   for i=1:m
for i=1:m-1
                                        P(i,piv(i))=1;
    %pivoting
                                   end;
    [pm,kp]=max(abs(A(i:m,i)));
                                   U=triu(A):
    kp=kp+i-1;
                                   L=tril(A,-1)+eve(m);
    %line interchange
    if i~=kp
        A([i,kp],:)=A([kp,i],:);
        piv([i,kp])=piv([kp,i]);
    end
```

Exemplu

Rezolvaţi sistemul

$$\left[\begin{array}{ccc} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \\ 2 & 4 & 2 \end{array}\right] x = \left[\begin{array}{c} 3 \\ 4 \\ 8 \end{array}\right]$$

prin descompunere LUP.

Soluţie: Avem

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 1 & 2 \\ 3 & 2 & 4 & 2 \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} 3 & 2 & 4 & 2 \\ 2 & 1 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} 3 & 2 & 4 & 2 \\ 2 & \frac{1}{2} & 1 & 2 \\ 1 & \frac{1}{2} & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 3 & 2 & 4 & 2 \\ 2 & \frac{1}{2} & -1 & 1 \\ 1 & \frac{1}{2} & -1 & 0 \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} 3 & 2 & 4 & 2 \\ 2 & \frac{1}{2} & -1 & 1 \\ 1 & \frac{1}{2} & 1 & 0 \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} 3 & 2 & 4 & 2 \\ 2 & \frac{1}{2} & -1 & 1 \\ 1 & \frac{1}{2} & 1 & -1 \end{bmatrix}.$$

Exemplu (continuare)

Deci

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad U = \begin{bmatrix} 2 & 4 & 2 \\ 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad P = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Sistemele triunghiulare corespunzătoare sunt

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & 1 & 1 \end{bmatrix} y = Pb = \begin{bmatrix} 8 \\ 4 \\ 3 \end{bmatrix},$$

cu soluția
$$y = [8, 0, -1]^T$$

◄□▶◀圖▶◀불▶◀불▶ 불 쒸٩@

Exemplu (continuare)

şi

$$\begin{bmatrix} 2 & 4 & 2 \\ 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} x = \begin{bmatrix} 8 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix},$$

cu soluția $x = [1, 1, 1]^T$.

Verificare

$$PA = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \\ 2 & 4 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 4 & 2 \\ 1 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

$$LU = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & 1 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 2 & 4 & 2 \\ 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 4 & 2 \\ 1 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}.$$



Pivotare totală

• Dacă se selectează pivoți din coloane diferite, sunt necesare matrice de permutare la stânga Q_k :

$$L_{m-1}P_{m-1}\cdots L_2P_2L_1P_1AQ_1Q_2\cdots Q_{m-1} = U$$

$$(L'_{m-1}\cdots L'_2L'_1)(P_{m-1}\cdots P_2P_1)A(Q_1Q_2\cdots Q_{m-1}) = U$$

Punem

$$L = (L'_{m-1} \cdots L'_2 L'_1)^{-1}$$

$$P = P_{m-1} \cdots P_2 P_1$$

$$Q = Q_1 Q_2 \cdots Q_{m-1}$$

pentru a obține

$$PAQ = LU$$





Liu Hui c. 220 -c. 280 Matematician chinez, a discutat eliminarea "gaussiană" în comentariile sale asupra lucrării "Cele nouă capitole ale artei matematice" 263 AD



Carl Friedrich Gauss 1777-1855 Matematică, astronomie, geodezie, magnetism 1809 GE (Ca adolescent în Braunschweig a descoperit teorema binomială. reciprocitatea pătratică, media aritmetico-geometrică...) 1807-1855: Universitatea din Göttingen - > < -> < -> <

Stabilitatea LU fără pivotare

• Pentru A = LU calculată fără pivotare:

$$\widetilde{L}\widetilde{U} = A + \delta A, \qquad \frac{\|\delta A\|}{\|L\| \|U\|} = O(\text{eps})$$

- Eroare se referă la $\widetilde{L}\widetilde{U}$, nu la \widetilde{L} sau \widetilde{U}
- Notă: la numitor apare ||L|| ||U||, nu ||A||
- ||L|| și ||U|| pot fi arbitrar de mari, de exemplu

$$A = \begin{bmatrix} 10^{-20} & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 10^{20} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 10^{-20} & 1 \\ 0 & 1 - 10^{20} \end{bmatrix}$$

• Deci, algoritmul este nestabil



Stabilitatea LU cu pivotare

- Daca se face pivotare, toate elementele lui L sunt ≤ 1 în modul, deci $\|L\| = O(1)$
- ullet Pentru a măsura creșterea lui U, se introduce factorul de creștere

$$\rho = \frac{\max_{ij} |u_{ij}|}{\max_{ij} |a_{ij}|}$$

care implică $||U|| = O(\rho ||A||)$

• Pentru descompunerea PA = LU calculată cu pivotare:

$$\widetilde{L}\widetilde{U} = PA + \delta A, \qquad \frac{\|\delta A\|}{\|A\|} = O(\rho \text{eps})$$

• Dacă ho = O(1), atunci algoritmul este regresiv stabil

- 4 ロ ト 4 昼 ト 4 夏 ト 4 夏 - り Q (^)

Factorul de creștere l

Considerăm matricea

- Nu apare nici o pivotare, deci aceasta este o factorizare PA = LU
- Factorul de creștere $ho=16=2^{m-1}$ (se poate arăta că acesta este cazul cel mai nefavorabil)
- Deci, $\rho=2^{m-1}={\it O}(1)$, uniform, pentru toate matricele de dimensiune m
- Regresiv stabil conform definiției, dar rezultatul poate fi inutil
- Totuși, nu se știe exact de ce, factorii de creștere sunt mici în practică

Factorul de creștere II

- **Conjectură**: factorii de creștere de ordin mai mare ca 1/2 sunt rari în practică
- adică, pentru orice $\alpha > 1/2$ și M > 0, probabilitatea evenimentului $\rho > m^{\alpha}$ este mai mică decât m^{-M} , pentru m suficient de mare.

$$\forall \alpha > \frac{1}{2} \forall M > 0 \exists m_0, \forall m > m_0 \ P(\rho > m^{\alpha}) < m^{-M}.$$

Problemă deschisă: conjectura este adevărată sau falsă?



Matrice SPD

- Reamintim:
 - $A \in \mathbb{R}^{m \times m}$ este simetrică dacă $a_{ij} = a_{ji}$, sau $A = A^T$
 - $A \in \mathbb{C}^{m \times m}$ este hermitiană dacă $a_{ij} = \overline{a}_{ji}$, sau $A = A^*$
- O matrice hermitiană A este hermitian pozitiv definită dacă $x^*Ax>0$ pentru $x\neq 0$
 - x^*Ax este întotdeauna real deoarece $x^*Ay = \overline{y^*Ax}$
 - Simetric pozitiv definită, sau SPD, pentru matrice reale
- dacă A este $m \times m$ PD și X are rang maxim, atunci X^*AX este PD
 - Deoarece $(X^*AX)^* = X^*AX$, și dacă $x \neq 0$ atunci $Xx \neq 0$ și $x^*(X^*AX)x = (Xx)^*A(Xx) > 0$
 - Orice submatrice principală a lui A este PD, și orice element diagonal $a_{ii} > 0$
- matricele PD au valori proprii reale pozitive şi vectori proprii ortonormali

4 D > 4 B > 4 B > 4 B > 9 C

Factorizarea Cholesky

Se elimină sub pivot și la dreapta pivotului (datorită simetriei):

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & w^* \\ w & K \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha & 0 \\ w/\alpha & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha & w^*/\alpha \\ 0 & K - ww^*/a_{11} \end{bmatrix}$$
$$= \begin{bmatrix} \alpha & 0 \\ w/\alpha & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & K - ww^*/a_{11} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha & w^*/\alpha \\ 0 & I \end{bmatrix} = R_1^* A_1 R_1$$

unde
$$\alpha = \sqrt{a_{11}}$$

• $K - ww^*/a_{11}$ este o submatrice principală a matricei PD $R_1^{*-1}AR_1^{-1}$, deci elementul ei din stânga sus este pozitiv

(ロト (個) (注) (注) 注 り(()

Factorizarea Cholesky

• Se aplică recursiv și se obține

$$A = (R_1^* R_2^* \dots R_m^*)(R_m \dots R_2 R_1) = R^* R, \quad r_{ii} > 0$$

- Existenţa şi unicitatea: orice matrice HPD are o factorizare Cholesky unică
 - Algoritmul recursiv de pe slide-ul precedent nu eșuează niciodată
 - Rezultă și unicitatea, deoarece $\alpha = \sqrt{a_{11}}$ este determinat unic (dat) la fiecare pas și la fel, întreaga linie w/α

Algoritmul de factorizare Cholesky

• Factorizează matricea HPD $A \in \mathbb{C}^{m \times m}$ în $A = R^*R$:

Factorizare Cholesky

$$R := A;$$
for $k := 1$ to m do
for $j := k + 1$ to m do
$$R_{j,j:m} := R_{j,j:m} - R_{k,j:m} \overline{R_{k,j}} / R_{k,k}$$

$$R_{k,k:m} := R_{k,k:m} / \sqrt{R_{k,k}}$$

Complexitatea (număr de operații)

$$\sum_{k=1}^{m} \sum_{j=k+1}^{m} 2(m-j) \sim 2 \sum_{k=1}^{m} \sum_{j=1}^{k} j \sim \sum_{k=1}^{m} k^2 \sim \frac{m^3}{3}$$

Exemplu

Să se rezolve sistemul

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 5 & 3 \\ 1 & 3 & 3 \end{bmatrix} x = \begin{bmatrix} 4 \\ 10 \\ 7 \end{bmatrix}$$

folosind descompunerea Cholesky.

• **Soluție**: Calculând radicalii pivoților și complementele Schur se obține

$$B = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ & 5 & 3 \\ & & 3 \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ & 1 & 1 \\ & & 2 \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ & 1 & 1 \\ & & 1 \end{bmatrix}.$$



Exemplu

Sistemele corespunzătoare sunt:

$$\left[\begin{array}{ccc} 1 & & \\ 2 & 1 & \\ 1 & 1 & 1 \end{array}\right] y = \left[\begin{array}{c} 4 \\ 10 \\ 7 \end{array}\right]$$

cu soluția
$$y = \begin{bmatrix} 4 & 2 & 1 \end{bmatrix}^T$$

și

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ & 1 & 1 \\ & & 1 \end{bmatrix} x = \begin{bmatrix} 4 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix},$$

cu soluția $x = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}^T$.



Stabilitatea

ullet Factorul Cholesky calculat \widetilde{R} satisface

$$\widetilde{R}^*\widetilde{R} = A + \delta A, \qquad \frac{\|\delta A\|}{\|A\|} = O(\text{eps})$$

algoritmul este regresiv stabil

ullet Dar, eroarea în \widetilde{R} poate fi mare ,

$$\|\widetilde{R} - R\| / \|R\| = O(\kappa(A) \text{eps})$$

- Rezolvare Ax = b pentru HPD A și cu două substituții
 - Numărul de operații Cholesky $\sim m^3/3$
 - Algoritm regresiv stabil:

$$(A + \Delta A)\widetilde{x} = b,$$
 $\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} = O(\text{eps})$

◆□▶ ◆□▶ ◆□▶ ◆□▶ ● める◆



John von Neumann (1903-1957)



André Louis Cholesky (1875-1918)

- x=A\b pentru A densă realizează următorii pași
- Dacă A este triunghiulară superior sau inferior se rezolvă prin substituţie inversă sau directă

- x=A\b pentru A densă realizează următorii pași
- Dacă A este triunghiulară superior sau inferior se rezolvă prin substituție inversă sau directă
- ② Dacă A este o permutare a unei matrice triunghiulare, se rezolvă prin substituție (utilă pentru [L,U]=lu(A) căci L este permutată)

- x=A\b pentru A densă realizează următorii pași
- Dacă A este triunghiulară superior sau inferior se rezolvă prin substituție inversă sau directă
- ② Dacă A este o permutare a unei matrice triunghiulare, se rezolvă prin substituţie (utilă pentru [L,U]=lu(A) căci L este permutată)
- Oacă A este simetrică sau hermitiană

- x=A\b pentru A densă realizează următorii pași
- Dacă A este triunghiulară superior sau inferior se rezolvă prin substituție inversă sau directă
- Dacă A este o permutare a unei matrice triunghiulare, se rezolvă prin substituție (utilă pentru [L,U]=lu(A) căci L este permutată)
- Dacă A este simetrică sau hermitiană
 - Se verifică dacă toate elementele diagonale sunt pozitive

- x=A\b pentru A densă realizează următorii pași
- Dacă A este triunghiulară superior sau inferior se rezolvă prin substituție inversă sau directă
- ② Dacă A este o permutare a unei matrice triunghiulare, se rezolvă prin substituţie (utilă pentru [L,U]=lu(A) căci L este permutată)
- Dacă A este simetrică sau hermitiană
 - Se verifică dacă toate elementele diagonale sunt pozitive
 - Se încearca cu Cholesky; daca se termina cu succes se rezolvă prin substituție

- x=A\b pentru A densă realizează următorii pași
- Dacă A este triunghiulară superior sau inferior se rezolvă prin substituție inversă sau directă
- Dacă A este o permutare a unei matrice triunghiulare, se rezolvă prin substituție (utilă pentru [L,U]=lu(A) căci L este permutată)
- Oacă A este simetrică sau hermitiană
 - Se verifică dacă toate elementele diagonale sunt pozitive
 - Se încearca cu Cholesky; daca se termina cu succes se rezolvă prin substituţie
- Dacă A este Hessenberg, se reduce la o matrice triunghiulară superior și apoi se rezolvă prin substituție inversă

- x=A\b pentru A densă realizează următorii pași
- Dacă A este triunghiulară superior sau inferior se rezolvă prin substituție inversă sau directă
- ② Dacă A este o permutare a unei matrice triunghiulare, se rezolvă prin substituţie (utilă pentru [L,U]=lu(A) căci L este permutată)
- Oacă A este simetrică sau hermitiană
 - Se verifică dacă toate elementele diagonale sunt pozitive
 - Se încearca cu Cholesky; daca se termina cu succes se rezolvă prin substituţie
- Dacă A este Hessenberg, se reduce la o matrice triunghiulară superior și apoi se rezolvă prin substituție inversă
- Dacă A este pătratică, se factorizează PA = LU şi se rezolvă prin substituție inversă

- x=A\b pentru A densă realizează următorii pași
- Dacă A este triunghiulară superior sau inferior se rezolvă prin substituție inversă sau directă
- ② Dacă A este o permutare a unei matrice triunghiulare, se rezolvă prin substituţie (utilă pentru [L,U]=lu(A) căci L este permutată)
- Oacă A este simetrică sau hermitiană
 - Se verifică dacă toate elementele diagonale sunt pozitive
 - Se încearca cu Cholesky; daca se termina cu succes se rezolvă prin substituție
- Dacă A este Hessenberg, se reduce la o matrice triunghiulară superior și apoi se rezolvă prin substituție inversă
- Dacă A este pătratică, se factorizează PA = LU și se rezolvă prin substituție inversă
- Dacă A nu este pătratică, se face factorizare QR cu metoda Householder, și se rezolvă problema de aproximare în sensul celor mai mici pătrate

Descompunere QR

• Fie $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$. Se numește descompunere QR a lui A perechea de matrice (Q, R) unde $Q \in \mathbb{C}^{m \times n}$ este unitară, $R \in \mathbb{C}^{n \times n}$ este triunghiulară superior și A = QR.

Triunghiularizare Householder

 Metoda lui Householder înmulțește cu matrice unitare pentru a transform matricea într-una triunghiulară; de exemplu la primul pas:

$$Q_1A = \left[egin{array}{cccc} r_{11} & imes & \cdots & imes \ 0 & imes & \cdots & imes \ 0 & imes & \cdots & imes \ 0 & imes & \cdots & imes \ \end{array}
ight]$$

• La sfârșit, am obținut un produs de matrice ortogonale

$$\underbrace{Q_n \dots Q_2 Q_1}_{Q^*} A = R$$

"Triunghiularizare ortogonală"

4 D F 4 D F 4 D F 9 0 C

Introducerea de zerouri

- Q_k introduce zerouri sub diagonală în coloana k
- Păstrează zerourile introduse anterior

Reflectori Householder

• Fie Q_k de forma

$$Q_k = \left[\begin{array}{cc} I & 0 \\ 0 & F \end{array} \right]$$

unde I este $(k-1) \times (k-1)$ și F este $(m-k+1) \times (m-k+1)$

• Creăm reflectorul Householder F care introduce zerouri:

$$x = \begin{bmatrix} \times \\ \times \\ \vdots \\ \times \end{bmatrix} \qquad Fx = \begin{bmatrix} \|x\| \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} = \|x\| e_1$$

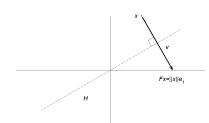
Reflectori Householder-Ideea

• Ideea: reflectăm în raport cu hiperplanul H, ortogonal pe $v = ||x||_2 e_1 - x$, aplicând matricea unitară

$$F = I - 2\frac{vv^*}{v^*v}$$

 A se compara cu proiectorul

$$P_{\perp v} = I - \frac{vv^*}{v^*v}$$



Determinarea reflectorului

• reflexie Householder: $P = I - 2uu^T$, $||u||_2 = 1$; P simetrică și ortogonală, deoarece $P = P^T$ și

$$PP^{T} = (I - 2uu^{T})(I - 2uu^{T}) = I - 4uu^{T} + 4uu^{T}uu^{T} = I$$

• Dorim $Px = [c, 0, ..., 0]^T = ce_1$ (anulăm toate componentele lui x exceptând prima)

$$Px = x - 2u(u^T x) = ce_1 \Longrightarrow u = \frac{1}{2u^T x} (x - ce_1)$$

 $||x||_2 = ||Px||_2 = |c|$

• obţinem u paralel cu $\widetilde{u} = x \pm ||x||_2 e_1$, deci $u = \widetilde{u} / ||\widetilde{u}||_2$. Orice alegere de semn corespunde; vom alege

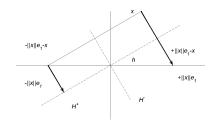
$$\widetilde{u} = [x_1 + sign(x_1) ||x||_2, x_2, ..., x_n]^T, \qquad u = \widetilde{u} / ||\widetilde{u}||_2.$$

◆ロト ◆御 ト ◆ 恵 ト ◆ 恵 ・ 夕 Q ②

Alegerea reflectorului

- ullet Putem aplica reflexia oricărui multiplu z al lui $\|x\|$ e_1 cu |z|=1
- Proprietăți numerice mai bune pentru ||v|| mare, de exemplu $v = \operatorname{sign}(x_1) ||x|| e_1 + x$

• Notă: sign(0) = 1, dar în MATLAB, sign(0)==0



Algoritmul lui Householder

- Calculează factorul R al descompunerii QR a matricei $m \times n$ A $(m \ge n)$
- Lasă rezultatul în A, memorând vectorii de reflexie v_k pentru utilizare ulterioară

Factorizare QR prin metoda Householder

for
$$k := 1$$
 to n do
 $x := A_{k:m,k};$
 $v_k := \text{sign}(x_1) ||x||_2 e_1 + x;$
 $v_k := v_k / ||v_k||_2;$
 $A_{k:m,k:n} = A_{k:m,k:n} - 2v_k (v_k^* A_{k:m,k:n})$

Aplicarea sau obținerea lui Q

- Calculăm $Q^*b=Q_n\dots Q_2Q_1b$ și $Qx=Q_1Q_2\dots Q_nx$ implicit
- Pentru a crea Q explicit, aplicăm pentru x = I

Calculul implicit al lui Q^*b

for
$$k := 1$$
 to n do

$$b_{k:m} = b_{k:m} - 2v_k (v_k^* b_{k:m});$$

Calculul implicit al lui Qx

for
$$k := n$$
 downto 1 do

$$x_{k:m} = x_{k:m} - 2v_k (v_k^* x_{k:m});$$

Complexitatea QR-Householder

Cea mai mare parte a efortului

$$A_{k:m,k:n} = A_{k:m,k:n} - 2v_k (v_k^* A_{k:m,k:n})$$

- Operații pe iterație:
 - 2(m-k)(n-k) pentru produsele scalare $v_k^*A_{k:m,k:n}$
 - (m-k)(n-k) pentru produsul exterior $2v_k(\cdots)$
 - (m-k)(n-k) pentru scăderea $A_{k:m,k:n} \cdots$
 - 4(m-k)(n-k) total
- Incluzând ciclul exterior, totalul devine

$$\sum_{k=1}^{n} 4(m-k)(n-k) = 4\sum_{k=1}^{n} (mn-k(m+n)+k^{2})$$

$$\sim 4mn^2 - 4(m+n)n^2/2 + 4n^3/3 = 2mn^2 - 2n^3/3$$





Figura: Alston S. Householder (1904-1993), matematician american. Contribuții importante: biologie matematică, algebră liniară numerică. Cartea sa "The Theory of Matrices in Numerical Analysis" a avut un mare impact asupra dezvoltării analizei numerice și a informaticii.



Figura: James Wallace Givens (1910-1993) Pionier al algebrei liniare numerice și informaticii

Exemplu

Calculați descompunerea QR a matricei

$$A = \left[\begin{array}{cc} 3 & 1 \\ 4 & 1 \end{array} \right].$$

Soluție. Reflexia pentru prima coloană este $P = I - 2uu^T$. Vectorul u se determină astfel:

$$\widetilde{u} = \begin{bmatrix} x_1 + sign(x_1) \|x\|_2 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3+5 \\ 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8 \\ 4 \end{bmatrix}.$$

$$\|\widetilde{u}\| = \sqrt{8^2 + 4^2} = 4\sqrt{5}$$

$$u = \frac{\widetilde{u}}{\|\widetilde{u}\|} = \begin{bmatrix} \frac{2\sqrt{5}}{5} \\ \frac{\sqrt{5}}{5} \end{bmatrix}.$$

Matricea de reflexie este

$$P = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} - 2 \begin{bmatrix} \frac{2\sqrt{5}}{5} \\ \frac{\sqrt{5}}{5} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{2\sqrt{5}}{5} \\ \frac{\sqrt{5}}{5} \end{bmatrix}^T$$
$$= \begin{bmatrix} -\frac{3}{5} & -\frac{4}{5} \\ -\frac{4}{5} & \frac{3}{5} \end{bmatrix} = Q^T.$$

Se obţine:

$$Q = \begin{bmatrix} -\frac{3}{5} & -\frac{4}{5} \\ -\frac{4}{5} & \frac{3}{5} \end{bmatrix}$$

$$R = Q^{T} A = \begin{bmatrix} -\frac{3}{5} & -\frac{4}{5} \\ -\frac{4}{5} & \frac{3}{5} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 3 & 1 \\ 4 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -5 & -\frac{7}{5} \\ 0 & -\frac{1}{5} \end{bmatrix}.$$

Rotații Givens I

O rotație Givens

$$R(\theta) = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}$$

rotește un vector $x \in \mathbb{R}^2$ în sens trigonometric cu unghiul θ

• Rotația Givens cu unghiul θ în coordonatele i și j se obține cu ajutorul matricei de mai sus, punând elementele ei în liniile și coloanele i și j și în rest elementele matricei unitate.

Rotații Givens II

Rotații Givens III

• Dându-se x, i și j putem anula x_j alegând $\cos \theta$ și $\sin \theta$ astfel încât

$$\begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_i \\ x_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{x_i^2 + x_j^2} \\ 0 \end{bmatrix},$$

adică

$$\cos \theta = \frac{x_i}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}}, \qquad \sin \theta = \frac{x_j}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}}.$$

 Algoritmul QR bazat pe rotații Givens este analog algoritmului bazat pe reflexii Householder, dar când anulăm coloana i se anulează un element la un moment dat.

| ロ ト 4回 ト 4 重 ト 4 重 ト ・ 重 ・ 夕 Q ()・